

ЕНЕРГІЯ ЗВ'ЯЗКУ ОСНОВНОГО СТАНУ ЕЛЕКТРОНА, ЩО ЗНАХОДИТЬСЯ В МАГНІТНОМУ ПОЛІ У ПОТЕНЦІАЛЬНІЙ ЯМІ СКІНЧЕНОЇ ГЛИБИНИ

Проведено розрахунок енергії зв'язку водневоподібної домішки в потенціальній ямі для скінченного потенціального бар'єра при наявності однорідного магнітного поля, прикладеного вздовж осі дроту. Розрахунок проводився з використанням варіаційної хвильової функції, в якій враховувалося обмеження з боку дроту, вплив кулонівського притягання між домішковим іоном і електроном. Досліджено залежність енергії зв'язку електрона для різних значень магнітного поля від радіуса квантового дроту в потенціальній ямі скінченної глибини.

There was calculated the energy of hydrogenlike impurity link in potential gap for finite potential boundary in homogeneous magnetic field applied along the axis of the wire. The calculation was performed using the variative wave function, where the restriction from the wire's side and Coulomb attraction between impuritive ion and electron were taken into consideration. The change of energy of electron for different meaning field from of the cylindric quantum wire radius for potential gap finite deep.

Дослідження гетерогенних систем та їх застосування висунуло ряд нових наукових проблем. Головна з них полягає у необхідності проникнути в мікромеханізми різних явищ на атомарному рівні та знайти взаємозв'язок між ними. Розв'язок цієї проблеми відкриває шлях керування поверхневими процесами.

В 80-ті роки прогрес в фізиці двовірних гетроструктур з квантовими ямами і їх прикладних застосуваннях спонукав вчених до вивчення систем, що володіють ще меншою розмірністю – квантових дротів і квантових точок. Експериментальна робота по виготовленню і дослідженню структур з квантовими дротами була розпочата біля 10-ти років тому. Досліджувались транспортні і емісійні властивості квантових дротів, вивчалось вертикальне тунелювання в структурах з квантових дротів. В лазерних структурах на квантових дротах виконані вимірювання фотолумінесценсії в інфрачервоній області спектру, вивчені раманівські спектри, проведені вимірювання оптичного підсилення і дослідження особливостей оптичних властивостей, особливо поляризаційних ефектів.

Мета даної роботи – обчислення енергії зв'язку основного стану водневоподібної домішки, локалізованої в центрі квантового дроту, при наявності магнітного поля, яке прикладене вздовж осі

дроту, для потенціальної ями скінченної глибини.

Для випадку потенціальної ями скінченної глибини потенціал має вигляд:

$$V(\rho) = \begin{cases} 0, 0 \leq \rho \leq R \\ V_0, \rho > R \end{cases} \quad (1)$$

Знайдемо енергію та хвильові функції електрона, що знаходиться в потенціальній ямі скінченної глибини при наявності зовнішнього магнітного поля без врахування кулонівської взаємодії. Відповідно до [1] рівняння Шредінгера для електрона, який знаходиться в магнітному полі, має вигляд:

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial \psi}{\partial \rho} \right) + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} \right) - \frac{i\hbar\omega_c}{2} \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} + \frac{m\omega_c}{8} \rho^2 \psi = E\psi \quad (2)$$

μ – ефективна маса електрона.

$\omega_c = \frac{|e|\hbar H}{c\mu_0}$, де H – напруженість магнітного поля;

c – швидкість світла; μ – маса електрона у вакуумі; e – заряд електрона.

Хвильову функцію електрона запишемо у вигляді:

$$\Psi = \frac{\ell^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi L}} \ell^{ik_z z}, \quad (3)$$

L – довжина основної області квантового дроту ($L \gg R$), $m=0, \pm 1, \pm 2, \dots$, – магнітне квантове число; k_z – квазіімпульс електрона при русі вздовж осі дроту O_z .

Рівняння для радіальної частини хвильової функції:

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(R'' + \frac{1}{\rho} R' - \frac{m^2}{\rho^2} R \right) + \left(E - \frac{p_z^2}{2\mu} - \frac{\mu \omega_c^2}{8} \rho^2 - \frac{\hbar \omega_c m}{2} \right) R = 0 \quad (4)$$

В нових незалежних змінних

$$\xi = \left(\mu \omega_c / 2\hbar \right) \rho^2 \quad (5)$$

рівняння (4) набуває вигляду:

$$\xi R'' + R' + \left(-\frac{\xi}{4} + \beta - \frac{m^2}{4\xi} \right) R = 0, \quad (6)$$

де

$$\beta = \frac{1}{\hbar \omega_c} \left(E - \frac{p_z^2}{2\mu} \right) - \frac{m}{2}. \quad (7)$$

Розв'язок рівняння (6) шукатимемо в вигляді:

$$R(\xi) = \ell^{-\frac{\xi}{2}} \xi^{\frac{|m|}{2}} \omega(\xi), \quad (8)$$

тоді для $\omega(\xi)$ отримаємо гіпергеометричне рівняння, розв'язком якого є вироджена гіпергеометрична функція:

$$\omega(\xi) = F \left\{ - \left(\beta - \frac{|m|+1}{2} \right), |m|+1, \xi \right\} \quad (9)$$

Хвильова функція електрона, який знаходиться всередині потенціальної ями [2], матиме вигляд:

$$\Psi_{in}(\rho, \varphi, z) = \frac{N}{\sqrt{2\pi L}} \exp(im\varphi) \exp(ik_z z) \times \exp \left(-\frac{\xi}{2} \right) \xi^{\frac{|m|}{2}} F \left\{ -a_{|m|l}, |m|+1, \xi \right\}, \quad (10)$$

де N – нормувальний множник; $a_{|m|l} = \beta - \frac{|m|+1}{2}$;

$\beta = \frac{k^2 a^2}{2}$; k – хвильовий вектор; $a = \sqrt{\frac{\hbar c}{|e|H}}$ – циклотронний радіус.

Хвильова функція ззовні ями:

$$\Psi_{out}(\rho, \varphi, z) = \frac{N}{\sqrt{2\pi L}} \frac{F \left\{ -a_{|m|l}, |m|+1, \xi R \right\}}{U \left\{ -a_{|m|l}, |m|+1, \xi R \right\}} \times$$

$$\times e^{im\varphi} e^{ik_z z} e^{-\frac{\xi}{2}} \xi^{\frac{|m|}{2}} U \left\{ -a'_{|m|l}, |m|+1, \xi \right\}, \quad (11)$$

де $U(-a_{|m|l}, |m|+1, \xi R)$ – функція, яка є розв'язком гіпергеометричного рівняння і залишається на нескінченності скінченною.

Перші аргументи в гіпергеометричних функціях F та U зв'язані співвідношенням:

$$a_{|m|l} = a'_{|m|l} + \frac{V_0}{\hbar \omega_c}; \quad (12)$$

вони знаходяться із дисперсійного рівняння, що в свою чергу отримується із граничної умови:

$$\frac{\partial}{\partial \rho} \Psi_{in}|_{\rho=R} = \frac{\partial}{\partial \rho} \Psi_{out}|_{\rho=R} \quad (13)$$

Нормувальний множник задається співвідношенням:

$$N^{-2} = a_c^2 \int_0^\xi \exp(-\xi) \xi^{|m|} F^2(-a_{|m|l}, |m|+1, \xi) + \frac{F^2(-a_{|m|l}, |m|+1, \xi R)}{U^2(-a'_{|m|l}, |m|+1, \xi R)} d\xi \int_\xi^\infty \exp(-\xi) \xi^{|m|} \times \quad (14)$$

Введемо позначення

$$\xi = \frac{\rho^2}{2a_c^2}; a_1 = \frac{N}{\sqrt{2\pi L}} \exp(im\varphi) \exp(ik_z z), \quad a_2 = \frac{F^2(-a_{|m|l}, |m|+1, \xi R)}{U^2(-a'_{|m|l}, |m|+1, \xi R)} \quad (15)$$

та знайдемо похідні від функцій Ψ_{in} , Ψ_{out} :

$$\Psi'_{in} = a_1 \exp \left(-\frac{\xi}{2} \right) \xi^{\frac{|m|}{2}} \xi' F \left\{ -a_{|m|l}, |m|+1, \xi \right\} \times \left\{ -\frac{1}{2} \frac{|m|}{\xi} \xi^{-1} + \frac{F'}{F} \right\}$$

$$\Psi'_{out} = a_1 a_2 \exp \left(-\xi/2 \right) \xi^{\frac{|m|}{2}} \xi' \times \times U \left\{ -a'_{|m|l}, |m|+1, \xi \right\} \left\{ -\frac{1}{2} \frac{|m|}{\xi} \xi^{-1} + \frac{U'}{U} \right\} \quad (16)$$

Із співвідношень (13), (14), (16), отримаємо рівняння для знаходження $a_{|m|l}$:

$$F'U - FU' = 0, \quad (17)$$

причому похідні від гіпергеометричних функцій зв'язані із гіпергеометричними функціями співвідношеннями:

$$F'(b, c, z) = \frac{b}{c} F(b+1, c+1, z), \quad (18)$$

$$U'(b, c, z) = -bU(b+1, c+1, z). \quad (19)$$

Власні коефіцієнти $a_{|m|l}$, $a'_{|m|l}$ визначаються із рівняння:

$$\frac{a_{|m|l}}{c} F\left(-a_{|m|l}+1, c+1, \xi_R\right) U\left(-a'_{|m|l}, c, \xi_R\right) + a'_{|m|l} F\left(-a_{|m|l}, c, \xi_R\right) U\left(-a'_{|m|l}+1, c+1, \xi_R\right) = 0. \quad (20)$$

Власні значення даються формулою:

$$E = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2\mu} + \hbar\omega_c \left(a_{|m|l} + \frac{m}{2} + \frac{1}{2} + \frac{|m|}{2} \right). \quad (21)$$

Варіаційні хвильові функції при наявності кулонівської взаємодії електрона із домішковим іоном запишуться, враховуючи (16) та (17), у вигляді:

$$\Psi(\vec{r}) = \begin{cases} Ne^{-\frac{\xi}{2}} F(-a_{01,1}, \xi) e^{-\lambda(\rho^2+z^2)^{\frac{1}{2}}}, & \text{при } 0 \leq \rho \leq R \\ N^2 \frac{F(-a_{01,1}, \xi_R)}{U(-a'_{01,1}, \xi_R)} e^{-\frac{\xi}{2}} U(-a'_{01,1}, \xi) e^{-\lambda(\rho^2+z^2)^{\frac{1}{2}}}, & \text{при } \rho > R \end{cases}$$

Величини $a_{|m|l}$, $a'_{|m|l}$ знаходяться з дисперсійного рівняння (20). Вираз для нормувального множника дається у вигляді:

$$N^{-2} = -2\pi \frac{d}{d\lambda} [K+M], \quad (22)$$

де

$$K = \int_0^R \rho r \exp\left(\frac{-\rho^2}{2a_c}\right) F^2\left(-a_{01,1}, \frac{\rho^2}{2a_c}\right) K_0(2\lambda\rho) d\rho$$

$$M = \frac{F^2(-a_{01,1}, \xi_R)}{U^2(-a'_{01,1}, \xi_R)} \int_R^\infty \rho r \exp\left(\frac{-\rho^2}{2a_c}\right) \times F^2\left(-a_{01,1}, \frac{\rho^2}{2a_c}\right) K_0(2\lambda\rho) d\rho \quad (23)$$

тут $K_0(2\lambda\rho)$ – модифікована функція Бесселя другого роду нульового порядку.

Середні значення кінетичної та потенціальної енергії задаються виразами:

$$\langle T \rangle = -2\pi N^2 \left(\hbar\omega_c \left(a_{01} + \frac{1}{2} \right) \frac{dK}{d\lambda} + \hbar\omega_c \left(a'_{01} + \frac{1}{2} \right) \frac{dM}{d\lambda} + \frac{\hbar^2 \lambda^2}{2\mu} \right)$$

$$\langle V \rangle = -\frac{4\pi e^2}{\epsilon_0} N^2 [K+M] - 2\pi V_0 N^2 \frac{dM}{d\lambda}, \quad (24)$$

$$E_b(R, H) = -\frac{\hbar^2 \lambda^2}{2\mu} - \frac{2e^2}{\epsilon_0} \frac{(K+M)}{d(K+M)/d\lambda}. \quad (25)$$

Розглянута гетероструктура може бути реалізована у вигляді циліндричного квантового дроту із матеріалу GaAs, поміщеного в середовище $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$. Глибина квантової ями $V_0 = 0,6(136x + 0,22x^2)$ (eV) (розрахунки проводились для концентрації алюмінію 0,4). На рисунку 1 зображено залежність енергії зв'язку E_b від радіуса квантового дроту для різних значень магнітного поля.

Для фіксованого значення магнітного поля енергія зв'язку зростає відносно значень в об'ємному зразку GaAs при зменшенні радіусу дроту, досягаючи максимуму, а потім прямує до фіксованого значення, яке відповідає енергії зв'язку електрона на домішковому рівні. Для фіксованого значення радіуса КД енергія зв'язку, як функція напруженості магнітного поля, зростає. На рис.2 зображено залежність енергії зв'язку як функції магнітного поля для різних значень радіуса КД. Для $R < 0,2 a_b$ енергія зв'язку така ж сама як і у ви-

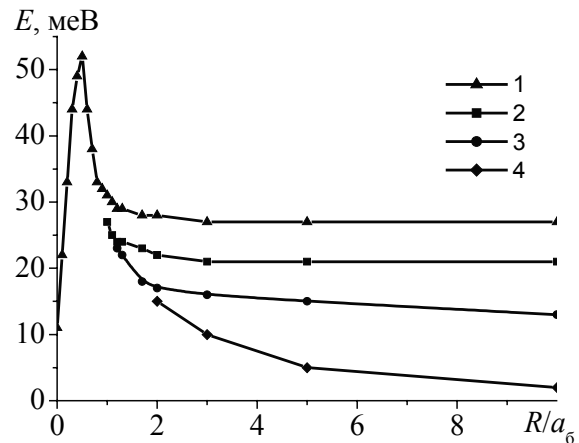


Рис.1. Графіки залежності енергії зв'язку електрона для різних значень магнітного поля від радіуса дроту: $H=0$ (1), $H=100$ кГс (2), $H=200$ кГс (3), $H=400$ кГс (4).

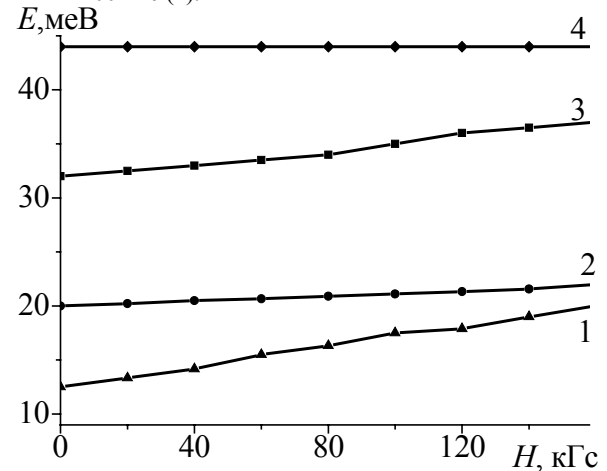


Рис.2. Графіки залежності енергії зв'язку електрона для різних значень радіуса КД від магнітного поля: $R/a_b=10$ (1), $R/a_b=2$ (2), $R/a_b=1$ (3), $R/a_b=0,5$ (4).

падку об'ємного зразку. Для проміжних значень $R \approx 0,2-2,0 a_B$ зміна енергії зв'язку зі зміною енергії поля є значно меншою, бо електронна хвильова функція є більш обмеженою потенціальним бар'єром. При $R > 2a_B$ енергія зв'язку сильно залежить від магнітного поля.

Отже, енергія зв'язку зростає із зменшенням радіуса КД. Врахування магнітного поля збільшує енергію зв'язку, особливо для великих радіусів КД. Крім того при певних значеннях напруженості магнітного поля енергія зв'язку має максимум для даного значення радіуса КД.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Coff S.L., Stebe B. Influence of longitudinal and lateral confinements on excitons in cylindrical quantum dots of semiconductors // Phys. Rev. B. - 1993. - **47**, No.3. - P.1383-1391.
2. Greus C., Spiegel R., Knipp P.A., Reinecke T.L. Photoluminescence excitation study of lateral-subband structure in barrier-modulated $\text{In}_{0,09}\text{Ga}_{0,91}\text{As}/\text{GaAs}$ quantum wires // Phys. Rev. B. -1994. - **49**, No.8. - P.3753-3762.
3. Hai G.Q., Peeters F.M., Devreese J.T. Electron Optical-Phonon Coupling in $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ Quantum Wells Due to Interface, Slab and Half-Space Modes // Phys. Rev. B. - 1993. - **48**, No.7. - P.4667-4678.
4. Greus C., Butov L., Daiminger F., Forchel A., Knipp P.A., Reinecke T.L. Lateral quantization in the optical emission of Barrier-modulated Wires // Phys. Rev. B. - 1993. - **47**, No.12. - P.7626-7636.
5. Бойчук В.И., Войцехивская О.Н., Головацкий В.А., Ткач Н.В. Спектр заряда в тонкой полупроводниковой пленке, контактирующей с массивными кристаллами произвольных проницаемостей // ФТТ. - 1995. - **37**, №3. - С.861-871.
6. Schoos D., Mews A., Eychmuller A., Weller H. Quantum-dot quantum well $\text{CdS}/\text{HgS}/\text{CdS}$: theory and experiment // Phys. Rev. B. - 1994. - **49**, No.24. - P.17072-17094.
7. Lin M.F., W. Kenneth-Shung Elementary excitations in cylindrical tubules // Phys. Rev. B. - 1993. - **47**, No.11. - P. 6617-6624.